

**Житомирський державний університет
імені Івана Франка
Природничий факультет
Кафедра хімії**

**ІНСТРУКТИВНО-МЕТОДИЧНІ МАТЕРІАЛИ ДО
ОРГАНІЗАЦІЇ САМОСТІЙНОЇ / ІНДИВІДУАЛЬНОЇ
РОБОТИ**

Обов'язкової освітньої компоненти

«КОМП'ЮТЕРНА ХІМІЯ»

**для підготовки здобувачів
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти**

Галузь знань	Е Природничі науки, математика та статистика
Спеціальність	ЕЗ Хімія
Предметна спеціальність	-
Спеціалізація	-
Освітня програма	Хімія
Факультет / ННІ	природничий

Укладачі:

к.х.н., доцент **Чайка Микола**,

к.х.н., доцент **Камінський Олександр**,

к.х.н., доцент **Денисюк Роман**

Розглянуто та схвалено

на засіданні кафедри хімії

Протокол від «__» червня 2026 р. № __

Завідувач кафедри Олена АНІЧКІНА

Житомир 2026

УДК 378.147:54:004.9(072)

*Рекомендовано до друку вченою радою Житомирського державного
університету імені Івана Франка
(протокол № 12 від «26» червня 2026 р.)*

Рецензенти:

Заблоцька Ольга – доктор педагогічних наук, завідувач кафедри технології медичної діагностики, реабілітації та здоров'я людини Житомирського медичного інституту Житомирської обласної ради.

Дорохов Віктор – кандидат хімічних наук, доцент кафедри ґрунтознавства та землеробства Поліського національного університету.

Тітов Юрій – доктор хімічних наук, професор кафедри хімії Житомирського державного університету імені Івана Франка.

Чайка М.В., Камінський О.М., Денисюк Р.О.

Інструктивно-методичні матеріали до організації самостійної/індивідуальної роботи із обов'язкової освітньої компоненти «Комп'ютерна хімія»: навчально-методичний посібник для підготовки здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти. – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2026. – 55 с.

© Чайка М. В., 2026

© Камінський О. М., 2026

© Денисюк Р. О., 2026

© Житомирський державний
університет імені Івана Франка, 2026

ЗМІСТ:

	ВСТУП	5
	КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ ЗНАНЬ	7
1	Лабораторне заняття № 1 Тема: Аналіз та візуалізація даних. Використання комп'ютерних технологій для розв'язування задач із хімії.	9
2	Лабораторне заняття № 2 Тема: Аналіз та візуалізація даних. Діаграми. Аналіз даних, поданих на діаграмах та графіках	12
3	Лабораторне заняття № 3 Тема: Створення структурних формул молекул за допомогою програми Isis Draw	15
4	Лабораторне заняття № 4 Тема: Модульна контрольна №1 «Сучасні методи комп'ютерної хімії та молекулярне моделювання»	17
5	Лабораторне заняття № 5 Тема: Побудова структурних формул органічних речовин за допомогою спеціального редактора хімічних формул ChemDraw	18
6	Лабораторне заняття № 6 Тема: Складання та запис рівнянь хімічних реакцій за допомогою спеціального редактора хімічних формул ChemDraw	21
7	Лабораторне заняття № 7 Тема: Створення трьохмірних моделей молекул за допомогою редактора Chem3D	24
8	Лабораторне заняття № 8 Тема: Побудова та оптимізація геометрії органічної молекули в програмі HyperChem	27
9	Лабораторне заняття № 9 Тема: Проведення квантово-хімічного розрахунку та аналіз електростатичного потенціалу молекули в HyperChem	30

10	Лабораторне заняття № 10	Тема: Розрахунок інфрачервоного (ІЧ) спектру молекули за допомогою програми HyperChem	33
11	Лабораторне заняття № 11	Тема: Розрахунок енергії та оптимізація геометрії органічної молекули за допомогою Gaussian	36
12	Лабораторне заняття № 12	Тема: Розрахунок інфрачервоного (ІЧ) спектру молекули за допомогою Gaussian	39
13	Лабораторне заняття № 13	Тема: Модульна контрольна №2 «Пакети програм ChemOffice та HyperChem, їх застосування»	41
14	Лабораторне заняття № 14	Тема: Візуалізація експериментальних даних за допомогою графічного математичного програмного пакету Origin	42
15	Лабораторне заняття № 15	Тема: Аналіз та візуалізація хімічних даних за допомогою програмного забезпечення Origin	45
16	Лабораторне заняття № 16	Тема: Побудова 3D-графіків розчинності речовин у різних розчинниках	48
17	Лабораторне заняття № 17	Тема: Інтеграція хімічних структур і моделей зі спеціалізованих редакторів у документи пакету MS Office	51
18	Лабораторне заняття № 18	Тема: Модульна контрольна №3 «Графічне відображення даних з використанням пакета програм Origin»	53

ВСТУП

Освітня компонента «Комп'ютерна хімія» вивчається здобувачами першого (бакалаврського) рівня вищої освіти на четвертому курсі та відповідає освітньо-професійній програмі Хімія.

Завдання для самостійної та індивідуальної роботи передбачають виконання таких видів робіт:

1. Робота з підручником та електронними виданнями

- ✓ Пошук матеріалу: Визначте тему та знайдіть її за змістом або предметним покажчиком (за ключовими словами). У мережі Інтернет використовуйте пошукові системи, не відволікаючись на сторонню інформацію.
- ✓ Опрацювання тексту: Уважно прочитайте матеріал, аналізуючи графіки, схеми та таблиці.
- ✓ Фіксація знань: Прочитайте текст повторно, складіть тезовий конспект. При появі незрозумілих термінів чи формул – з'ясуйте їхнє значення та ще раз перечитайте відповідний фрагмент.

2. Розв'язування вправ та задач

- ✓ Аналіз умови: Вдумливо прочитайте завдання, розмежуйте головні та другорядні дані, уявіть фізико-хімічний процес.
- ✓ Алгоритм розв'язку: Запишіть необхідні формули та урівняні рівняння реакцій. Сплануйте послідовність дій та виконайте розрахунки.
- ✓ Оформлення: Сформулюйте кінцеву відповідь (висновок), за потреби заповніть звітну таблицю.

3. Підготовка рефератів

- ✓ Збір матеріалу та конспектування: Опрацюйте літературу (як у п. 1), складіть план прочитаного та виділіть ключові питання.
- ✓ Підготовка доповіді: Сформуйте текст виступу з урахуванням аудиторії. Наприкінці роботи обов'язково зробіть висновки.

- ✓ Оформлення джерел: Складіть список використаної літератури згідно з вимогами ДАК (для веб-ресурсів обов'язково зазначайте повні електронні адреси).
- ✓ Технічні вимоги: Формат А4, шрифт Times New Roman – 14 пт, інтервал – 1,5. Поля: верхнє/нижнє – 2 см, ліве – 2,5 см, праве – 1,5 см.

4. Підготовка мультимедійної презентації

- ✓ Вміст: Презентація має містити: титульний слайд (тема, автор), зміст, характеристику сировини, опис технологічних процесів (з рівняннями реакцій та умовами), схеми апаратів, сфери застосування продукції та висновки.
- ✓ Візуальне оформлення:
 - Мінімум тексту на слайдах – лише ключові тези, що ілюструють промову. Великі масиви даних розбивайте на кілька слайдів або дозуйте за допомогою анімації.
 - Дотримуйтеся балансу: слайди не повинні бути порожніми або перевантаженими. Забезпечте чітку контрастність фону та шрифтів для читабельності схем і таблиць.
 - Усі рисунки та тематичні блоки слайдів повинні мати чіткі підписи.

КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ ЗАНЯТЬ

Оцінювання здобувачів вищої освіти здійснюється відповідно до «Положення про критерії та порядок оцінювання навчальних досягнень здобувачів вищої освіти Житомирського державного університету імені Івана Франка згідно з Європейською кредитною трансферно-накопичувальною системою»

https://zu.edu.ua/offic/ocinjuvannya_zvo.pdf.

Оцінювання навчальних досягнень здобувачів вищої освіти за всіма видами навчальних робіт проводиться за поточним, модульним та підсумковим контролем.

Кожен здобувач вищої освіти має виконати обов'язкові завдання, передбачені інструктивно-методичними матеріалами до лабораторних занять, методичними рекомендаціями до організації самостійної роботи здобувачів вищої освіти, силабусом, навчальною та робочою програмою освітньої компоненти.

Результати навчальної діяльності здобувачів вищої освіти оцінюються в балах, відповідно до виду діяльності. Визначений мінімум балів, який необхідно набрати для отримання заліку зазначений в робочій програмі навчальної дисципліни.

Критерії оцінювання

№	Лабораторна робота	Т	ТО	ЛР	Д
		15	25	50	10
1	№1				
2	№2				
3	№3				
4	№4				
5	№5				
6	№6				
7	№7				
8	№8				
9	№9				
10	№10				
11	№11				

12	№12				
13	№13				
14	№14				
15	№15				
16	№16				
17	№17				
18	№18				
19	№19				
Рейтинг		100			

Види діяльності на занятті: **Т** – тестовий контроль знань; **ТО** – теоретичне опитування; **ЛР** – виконання лабораторної роботи; **Д** – презентація підготовленої доповіді.

Модуль 1. Сучасні методи комп'ютерної хімії та молекулярне моделювання

Лабораторне заняття №1

Тема: Аналіз та візуалізація даних. Використання комп'ютерних технологій для розв'язування задач із хімії.

Мета: ознайомитися з методикою використання електронних таблиць Excel для розв'язування вправ та задач з хімії та під час обробки великої кількості експериментальних даних у професійній діяльності хіміка.

Основні поняття: електронні таблиці, масова частка речовини, електронна поляризація, густина розчину, графічна інтерпретація даних, автоматизація розрахунків.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. *Тестовий контроль знань*

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. *Теоретичне опитування за планом самостійної роботи*

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Які хімічні розрахунки найзручніше виконувати за допомогою електронних таблиць?
2. На що потрібно звертати увагу під час створення таблиці для обробки результатів експерименту?
3. Чому використання Excel спрощує роботу з великою кількістю експериментальних даних?
4. Що розуміють під електронною поляризацією речовини?

5. Від яких чинників може залежати показник заломлення розчину?
6. Чому під час розрахунків у таблицях рекомендують окремо записувати одиниці вимірювання?
7. Для чого в хімічних дослідженнях будують графіки та діаграми?
8. Які переваги має використання формул у Excel порівняно зі звичайними ручними обчисленнями?
9. Через що в електронних таблицях можуть виникати помилки в розрахунках?
10. У яких сферах професійної діяльності хіміка можуть використовуватися електронні таблиці?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання електронних таблиць під час виконання хімічних розрахунків.

Обробка результатів хімічного експерименту засобами MS Excel. Побудова графіків і діаграм для аналізу експериментальних даних у хімії.

Використання комп'ютерних технологій під час роботи з розчинами та концентраціями.

Автоматизація розрахунків у сучасній хімічній лабораторії.

Аналіз похибок хімічного експерименту за допомогою електронних таблиць.

Можливості Excel для роботи з великими обсягами експериментальних даних.

Використання електронних таблиць у фармацевтичних та екологічних дослідженнях.

Роль цифрових технологій у професійній діяльності хіміка.

Переваги комп'ютерної обробки даних у хімічних дослідженнях.

Практичне завдання

Створіть у середовищі MS Excel таблицю для розрахунку масової частки розчиненої речовини у кількох розчинах.

У таблиці передбачте:

- введення початкових даних;
- автоматичний розрахунок масової частки;
- побудову графіка залежності показника заломлення від концентрації;
- підпис стовпців та одиниць вимірювання.

Після виконання роботи проаналізуйте отримані результати та зробіть короткий висновок про характер залежності між досліджуваними величинами.

Рекомендована література

Основна:

1. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
2. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
3. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №2

Тема: Аналіз та візуалізація даних. Діаграми. Аналіз даних, поданих на діаграмах та графіках.

Мета: формування уявлень про способи візуалізації числових даних у вигляді діаграм та графіків, відпрацювання навичок застосування цих способів при вирішенні конкретних завдань з хімії.

Основні поняття: електронні таблиці, діаграма, лінія тренда, гістограма, кругова діаграма, легенда діаграми, область побудови діаграми.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. *Тестовий контроль знань*

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. *Теоретичне опитування за планом самостійної роботи*

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Для чого під час обробки експериментальних даних використовують діаграми та графіки?
2. Які типи діаграм можна створювати у програмі MS Excel?
3. Чим графік відрізняється від гістограми? Які переваги кожного з них?
4. Опишіть алгоритм побудови графіка за даними експерименту в Excel.
5. Для чого на графіку використовують дві осі Y?

6. Для чого необхідна лінія тренду? Як її можна застосовувати для аналізу результатів експерименту?
7. Який тип діаграми краще використовувати для відображення залежності складу розчину у відсотках?
8. Чому правильне визначення типу діаграми є важливим під час аналізу експериментальних даних?
9. Які помилки виникають під час побудови графіків та діаграм?
10. Як графічне відображення результатів допомагає виявляти закономірності у хімічному експерименті?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання графіків і діаграм для аналізу результатів експерименту.

Основні типи діаграм у MS Excel. Їх особливості застосування в хімії.

Візуалізація даних експерименту як важливий етап дослідження.

У яких випадках доцільно використовувати гістограму, графік або кругову діаграму?

Лінія тренду. Використання під час аналізу експериментальних результатів.

Можливості Excel для обробки та аналізу результатів експерименту.

Використання графічних методів для прогнозування результатів у хімії.

Побудова та аналіз графіків в звітах і презентаціях.

Типові помилки під час побудови діаграм та способи їх уникнення.

Роль комп'ютерної візуалізації експериментальних даних у хімічних дослідженнях.

Практичне завдання

У програмі MS Excel побудуйте графічну залежність розчинності речовини від температури або залежності швидкості реакції від часу.

Виконавучи роботу:

- додайте експериментальні дані до таблиці;
- оберіть найбільш доцільний тип діаграми;
- підпишіть осі та одиниці вимірювання;
- сформууйте лінію тренду;
- проаналізуйте характер отриманої залежності.

Після побудови графіка зробіть короткий висновок щодо зміни досліджуваної величини.

Рекомендована література

Основна:

1. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
2. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
3. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №3

Тема: Створення структурних формул молекул за допомогою програми Isis Draw.

Мета: Ознайомитися з основними можливостями програми *Isis Draw* як засобу побудови структур органічних і неорганічних молекул. Навчитися створювати, редагувати, зберігати та експортувати молекулярні формули. Формувати навички використання візуального редактора для створення хімічних зображень та схем.

Основні поняття: Isis Draw, хімічний редактор, робоче поле, інструментальна панель, SMILES, експорт.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Для чого хіміки використовують у роботі програму Isis Draw?
2. Охарактеризуйте основні елементи робочого вікна програми?
3. Етапи побудови структурної формули органічної сполуки у програмі?
4. Як у програмі змінювати типи хімічних зв'язків?

5. Які наявні готові шаблони фрагментів молекул для побудови?
6. Як зберегти хімічну формулу для наступного її редагування?
7. Експорт зображення молекулярних структур.
8. Етапи вставлення формул в текстовий документ або до презентації?
9. Переваги комп'ютерного створення структурних формул порівняно з ручним малюванням.

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Переваги Isis Draw для побудови структурних формул речовин.

Порівняння програм Isis Draw, ChemDraw і ChemSketch.

Сучасні комп'ютерні технології для візуалізації молекулярних структур.

Особливості створення органічних і неорганічних структур у хімічних редакторах.

Використання Isis Draw під час підготовки лабораторних робіт і наукових презентацій.

Переваги електронних хімічних редакторів у навчанні хімії.

Використання можливостей комп'ютерної графіки у хімічних дослідженнях.

Практичне завдання

В програмі Isis Draw побудуйте структурні формули:

- етанолу;
- бензену;
- оцтової кислоти;
- амінокислоти гліцину.

Під час виконання роботи:

- використовуйте різні типи хімічних зв'язків;
- підпишіть атоми та наявні функціональні групи;

- збережіть створені структури;
- експортуйте формули у графічному форматі.

Після побудови порівняйте можливості комп'ютерного та ручного способу зображення структурних формул і зробіть висновки.

Рекомендована література

Основна:

1. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
2. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
3. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №4

Тема: Модульна контрольна №1 «Сучасні методи комп'ютерної хімії та молекулярне моделювання»

Обсяг вимог визначається програмою

Модуль 2. Пакети програм ChemOffice та HyperChem, їх застосування

Лабораторне заняття №5

Тема: Побудова структурних формул органічних речовин за допомогою спеціального редактора хімічних формул ChemDraw.

Мета: Оволодіти базовими та розширеними навичками використання інструментів редактора ChemDraw для створення, редагування, конвертації структурних формул органічних речовин, у тому числі з використанням SMILES-коду, назв ІЮПАК та інструментів аналізу.

Основні поняття: структурна формула, SMILES, шаблони (Templates), IUPAC, Convert Name to Structure, Clean Up Structure, Check Structure, властивості молекули.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Для яких задач у органічній хімії можна використовувати програму ChemDraw?
2. Які інструменти найчастіше застосовують під час побудови структурних формул у ChemDraw?
3. SMILES-код та основні сфери його використання у хімічних редакторах.

4. Можливості команди «Convert Name to Structure» під час роботи з хімічними формулами.
5. Для чого використовують функцію «Clean Up Structure»?
6. Яку інформацію про молекулу можна отримати за допомогою інструмента «Chemical Properties»?
7. Типові помилки під час створення структурних формул у ChemDraw.
8. Переваги комп'ютерного моделювання структур порівняно з їх ручним зображенням.

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання ChemDraw під час вивчення органічної хімії.

Можливості ChemDraw і MarvinSketch для побудови структурних формул. Переваги та недоліки.

Автоматичне створення структур за назвами хімічних сполук.

Типові помилки під час побудови молекулярних структур.

Використання шаблонів органічних молекул у спеціальному програмному забезпеченні.

Можливості комп'ютерних редакторів для оформлення наукових робіт з хімії.

Роль цифрових технологій у візуалізації структури хімічних сполук.

Практичне завдання

У ChemDraw створіть структурні формули: бензену, етанолу, ацетону, аланіну (*дві сполуки на вибір*).

Під час виконання роботи:

- використовуйте шаблони органічних структур;
- спробуйте побудувати одну зі сполук за її SMILES-кодом;
- застосуйте функцію «Clean Up Structure»;
- перевірте правильність побудованої структури;

- перегляньте основні властивості створеної молекули.

Після завершення роботи збережіть створені структури та експортуйте одну з них для вставлення у текстовий документ або презентацію.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернівці: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.
5. Білий О.В., Біла Н.І. Створення та редагування хімічної графіки в програмі ChemDraw. Учбово-методичний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2003. 45 с.

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №6

Тема: Складання та запис рівнянь хімічних реакцій за допомогою спеціального редактора хімічних формул ChemDraw.

Мета: Навчитися зображати рівняння хімічних реакцій (неорганічних та органічних), створювати механізми реакцій із застосуванням стрілок, позначати реакційні центри та опрацьовувати структурні формули з дотриманням хімічної номенклатури.

Основні поняття: структурна формула, йонне рівняння, механізм реакції, стрілки реакцій, хімічна символіка, приєднання, заміщення, Templates.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Можливості ChemDraw для запису хімічних реакцій.
2. Як у ПЗ створити схему хімічної реакції з формулами реагентів і продуктів реакції?
3. Для чого під час побудови рівнянь використовують різні типи стрілок?
4. Чи можна у ChemDraw можна оформити йонне рівняння реакції? Опишіть алгоритм.

5. Інструменти програми для редагування та вирівнювання структурних формул.
6. Типові помилки під час створення схем реакцій у ПЗ.

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання ChemDraw для запису та оформлення хімічних реакцій.

Візуалізація механізму органічних реакцій у ChemDraw.

Можливості вкладки Templates під час побудови рівнянь реакції та складних молекулярних структур.

Типові помилки під час створення рівнянь хімічних реакцій у ChemDraw.

Переваги цифрового створення структурних формул та хімічних реакцій.

Роль хімічних редакторів в органічній хімії та хімії ВМС.

Практичне завдання

У програмі ChemDraw створіть схеми таких реакцій: приєднання у алкенах, заміщення в алканах, повного йонного рівняння реакції.

Під час виконання роботи:

- використовуйте стрілки;
- підпишіть реагенти та продукти реакції;
- позначте реакційні центри або за потреби напрям зміщення електронів;
- використовуйте шаблони молекул із вкладки Templates.

Після завершення роботи збережіть створені схеми та підготуйте одну з реакцій для вставлення у текстовий документ або презентацію.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.
5. Білий О.В., Біла Н.І. Створення та редагування хімічної графіки в програмі ChemDraw. Учбово-методичний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2003. 45 с

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №7

Тема: Створення трьохмірних моделей молекул за допомогою редактора Chem3D.

Мета: Навчитися використовувати програму Chem3D для побудови 3D-моделей молекул, оптимізації геометрії, перегляду валентних кутів і довжин зв'язків, збереження моделей для подальшої презентації або розрахунків.

Основні поняття: трьохмірна модель, валентні кути, оптимізація геометрії, Ball & Stick, 3D-молекула, енергетичний мінімум, імпорту/експорту структур.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. *Тестовий контроль знань*

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. *Теоретичне опитування за планом самостійної роботи*

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Для чого в хімії використовують 3D-моделі молекул?
2. Можливості Chem3D для дослідження будови молекул?
3. У яких форматах можна відкривати або зберігати формули в Chem3D?
4. Що означає оптимізація геометрії молекули та з якою метою її виконують?
5. Охарактеризуйте режими відображення молекул у Chem3D.

6. Порівняйте режими Ball & Stick та Space-Filling для візуалізації структури молекул.
7. Чому 3D-моделі молекул є більш інформативними порівняно з плоскою структурою?
8. У яких галузях науки і техніки використовують 3D-моделювання молекулярних структур?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання Chem3D для побудови та аналізу 3D-моделей молекул.

Можливості 3D-візуалізації у сучасній хімії та біохімії.

Комп'ютерна оптимізація геометрії молекул та її практичне значення.

Комп'ютерне 3D-моделювання як метод дослідження будови речовин.

Можливості Chem3D для підготовки графічних матеріалів і презентацій.

Роль цифрових технологій у вивченні просторової будови молекул.

Практичне завдання

У програмі Chem3D створіть тривимірні моделі: молекули метану, етанолу, бензену, гліцину (*дві на вибір*).

Під час виконання роботи:

- оберіть різні режими відображення молекул;
- оптимізуйте геометрію молекулярної структури;
- визначте довжину одного з хімічних зв'язків;
- встановіть величину валентного кута;
- збережіть створені моделі.

Після завершення роботи порівняйте особливості відображення молекул у різних режимах візуалізації та зробіть короткий висновок.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.
5. Білий О.В., Біла Н.І. Створення та редагування хімічної графіки в програмі ChemDraw. Учбово-методичний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2003. 45 с

Додаткова:

1. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
2. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №8

Тема: Побудова та оптимізація геометрії органічної молекули в програмі HyperChem.

Мета: Ознайомитися з основами роботи в програмі *HyperChem*. Навчитися будувати 3D-моделі молекул, виконувати попередню геометричну оптимізацію та розраховувати основні фізико-хімічні параметри простої органічної молекули.

Основні поняття: HyperChem, молекулярна геометрія, оптимізація геометрії, MM+, Semi-Empirical (AM1, PM3), Partial Charge.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Для чого у комп'ютерній хімії використовують програму HyperChem?
2. Етапи створення 3D-моделі молекули в HyperChem.
3. Порівняйте методи молекулярної механіки MM+ та напівемпіричні методи AM1 або PM3.
4. Частковий заряд атома в молекулі. Яку інформацію він може дати?
5. Які фізико-хімічні параметри можна визначати за допомогою HyperChem?

6. Як у програмі можна змінювати спосіб відображення молекулярної моделі?
7. У яких форматах зазвичай зберігають створені молекулярні моделі у програмі?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання HyperChem у хімії.

Методи геометричної оптимізації молекул та їх практичне значення.

Використання комп'ютерного моделювання для дослідження властивостей речовин.

Розрахунок часткових зарядів атомів та їх інтерпретація.

Можливості HyperChem під час вивчення органічної та фізичної хімії.

Віртуальні ІЧ-спектри та аналіз коливань молекул у HyperChem.

Практичне завдання

У середовищі HyperChem створіть 3D-модель однієї з органічних молекул на вибір: етанолу, ацетону, фенолу, оцтової кислоти.

Під час виконання роботи:

- Побудуйте структурну формулу молекули;
- виконайте оптимізацію геометрії методом MM+;
- встановіть часткові заряди атомів;
- дослідіть основні геометричні параметри структури;
- змініть режими відображення моделі.

Після завершення роботи порівняйте вигляд початкової та оптимізованої структури й зробіть короткий висновок щодо змін геометрії молекули.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №9

Тема: Проведення квантово-хімічного розрахунку та аналіз електростатичного потенціалу молекули в HyperChem.

Мета: Навчитися використовувати розширені можливості програми HyperChem: проводити квантово-хімічні розрахунки, аналізувати електростатичний потенціал та створювати графічні зображення молекул з відображенням зарядів і енергетичних характеристик.

Основні поняття: HyperChem, електростатичний потенціал Surface Map, Orbital map.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Можливості HyperChem для виконання квантово-хімічних розрахунків.
2. Що показує електростатичний потенціал молекули та як його можна візуалізувати?
3. Яку інформацію можна отримати з карти електростатичного потенціалу (Surface Map)?
4. Етапи виконання енергетичного розрахунку методом PM3
5. Orbital Map у комп'ютерній хімії.

6. Які параметри молекули можна дослідити після проведення квантово-хімічного розрахунку?
7. Як пов'язані електростатичний потенціал і можливі реакційні центри молекули?
8. У яких галузях сучасної хімії використовують результати квантово-хімічного моделювання?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання квантово-хімічних методів у сучасній комп'ютерній хімії.

Карти електростатичного потенціалу та їх значення під час аналізу молекул.

Можливості проведення моделювання міжмолекулярних взаємодій у програмі HyperChem.

Використання напівемпіричних методів PM3 та AM1 у комп'ютерному моделюванні.

Аналіз електронної будови молекул за допомогою HyperChem.

Візуалізація електронної густини та її значення для прогнозування властивостей речовин.

Можливості HyperChem у проведенні наукових досліджень в хімії.

Практичне завдання

У HyperChem виконайте квантово-хімічний розрахунок для однієї з молекул: метанолу, ацетону, фенолу, молочної кислоти.

Під час виконання роботи:

- створіть або імпортуйте модель молекули;
- проведіть попередню оптимізацію геометрії;
- здійсніть розрахунок методом PM3;
- побудуйте карту електростатичного потенціалу;
- встановіть області молекули з найбільшою ймовірністю проходження міжмолекулярних взаємодій.

Після завершення роботи проаналізуйте отримані результати та зробіть короткий висновок щодо реакційної здатності досліджуваної молекули.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №10

Тема: Розрахунок інфрачервоного (ІЧ) спектру молекули за допомогою програми HyperChem.

Мета: Навчитися будувати модель молекули в середовищі HyperChem, виконувати геометричну оптимізацію та проводити квантово-хімічний розрахунок вібраційних частот, на основі яких формуються ІЧ-спектри. Ознайомитися з базовими принципами віртуального ІЧ-аналізу.

Основні поняття: ІЧ-спектр, коливальні частоти, геометрична оптимізація, вібраційний аналіз, нормальні коливання.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Смуги поглинання в ІЧ-спектрі молекули. Валентні та деформаційні коливання.
2. Для чого перед проведенням вібраційного аналізу виконують оптимізацію геометрії молекули?
3. Як у HyperChem дослідити нормальні коливання молекули?
4. Чому результати квантово-хімічних розрахунків відрізняються від реального експериментального спектру?

5. Яку інформацію про будову речовини можна отримати з її ІЧ-спектра?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

ІЧ-спектроскопія та її роль для дослідження органічних речовин.

Ідентифікація функціональних груп за допомогою ІЧ-спектрів.

Використання HyperChem у дослідженні ІЧ-спектрів.

Валентні та деформаційні коливання молекул: особливості й відмінності.

Квантово-хімічні методи розрахунку спектрів.

ІЧ-спектроскопія у фармацевтичному аналізі.

Можливості сучасного програмного забезпечення для молекулярного моделювання та спектрального аналізу.

Практичне завдання

У HyperChem побудуйте модель однієї з молекул: етину, пропанолу, етанової кислоти чи бензену.

Під час виконання роботи:

- створіть чи імпортуйте структуру молекули;
- здійсніть оптимізацію геометрії;
- побудуйте віртуальний ІЧ-спектр молекуль;
- визначте характерні смуги поглинання;
- перегляньте нормальні коливання для однієї з вибраних частот.

Після завершення роботи проаналізуйте отриманий спектр та зробіть короткий висновок щодо наявності функціональних груп у досліджуваній молекулі.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.

2. Олексєюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №11

Тема: Розрахунок енергії та оптимізація геометрії органічної молекули за допомогою Gaussian.

Мета: Навчитися створювати молекулярні моделі в середовищі GaussView, експортувати їх до Gaussian, запускати базові квантово-хімічні розрахунки оптимізації геометрії та повної енергії, інтерпретувати результати. Зрозуміти роль функціоналу та базисного набору у розрахунках.

Основні поняття: Gaussian, GaussView, оптимізація геометрії, SCF (Self-Consistent Field), Basis Set (базисний набір), DFT (Density Functional Theory).

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Можливості програми GaussView для підготовки розрахунків у Gaussian.
2. Що таке базисний набір та яким чином його вибір впливає на результати дослідження?
3. У чому полягає різниця методів HF, DFT і MP2 під час моделювання молекулярних систем?
4. Що таке SCF-процедура у квантово-хімічних розрахунках?

5. Як перевірити, чи виконий розрахунок у Gaussian вірний?
6. Яку інформацію можна отримати після розрахунку енергії молекули у програмі Gaussian?
7. У яких галузях хімії використовують квантово-хімічні розрахунки?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Використання Gaussian у сучасній хімії. Переваги та можливості Базисні набори у Gaussian: призначення та особливості вибору.

Метод DFT та його роль у моделюванні молекул.

Особливості роботи з файлами у Gaussian.

Порівняння можливостей Gaussian, HyperChem і Chem3D.

Аналіз квантово-хімічних розрахунків у Gaussian.

Роль комп'ютерного моделювання у прогнозі властивостей речовин.

Практичне завдання

У GaussView створіть модель двох молекул на вибір: бутанол, етин, бензойна кислота, етаналь.

Під час виконання роботи:

- зобразіть початкову геометрію молекули;
- створіть вхідний файл для Gaussian;
- проведіть оптимізацію геометрії методом DFT або HF;
- встановіть повну енергію системи;
- порівняйте вигляд початкової та оптимізованої структури.

Після завершення роботи зробіть короткий висновок щодо впливу геометричної оптимізації на будову молекули та стабільність системи.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program

ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.

2. Олексюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.

3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.

4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.

2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.

3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №12

Тема: Розрахунок інфрачервоного (ІЧ) спектру молекули за допомогою Gaussian.

Мета: Навчитися виконувати квантово-хімічний розрахунок вібраційних частот у програмі Gaussian з використанням інтерфейсу GaussView, аналізувати отриманий ІЧ-спектр, інтерпретувати основні вібраційні моди та порівнювати їх із літературними даними..

Основні поняття: ІЧ-спектроскопія, нормальні коливання, вібраційний аналіз, уявні частоти.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Розрахунок ІЧ-спектра молекули у Gaussian.
2. Що означає поява уявної частоти після здійснення розрахунку?
3. Чому перед проведенням вібраційного аналізу у ПЗ необхідно виконати оптимізацію геометрії структури?
4. Які функціональні групи зазвичай дають найбільш інтенсивні смуги в ІЧ-спектрі?
5. Як полярність зв'язку впливає на інтенсивність смуг поглинання?

6. Яким способом у GaussView можна переглянути візуалізацію нормальних коливань молекули?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Можливості Gaussian у розрахунку та аналізі ІЧ-спектрів.

Порівняння функціоналу HyperChem і Gaussian для спектральних розрахунків.

Метод DFT та його застосування під час розрахунку вібраційних частот.

Нормальні коливання молекул та способи їх візуалізації у GaussView.

Причини відмінностей між експериментальними та розрахованими ІЧ-спектрами молекул.

Практичне завдання

У GaussView створіть модель однієї з молекул: метанол, ацетону, аналін чи бензальдегід.

Під час виконання роботи:

- зобразіть структуру молекули;
- проведіть оптимізацію геометрії;
- здійсніть розрахунок вібраційних частот;
- побудуйте розрахований ІЧ-спектр;
- встановіть характерні смуги поглинання.

Після завершення роботи порівняйте отримані частоти з літературними даними та зробіть короткий висновок щодо правильності проведеного розрахунку.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.

2. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №13

**Тема: Модульна контрольна №2 «Пакети програм
ChemOffice та HyperChem, їх застосування»**

Обсяг вимог визначається програмою

Модуль 3. Графічне відображення даних з використанням пакета програм Origin.

Лабораторне заняття №14

Тема: Візуалізація експериментальних даних за допомогою графічного математичного програмного пакету Origin.

Мета: навчитися будувати графіки за табличними даними та оформлювати атрибути графіків: підписи, легенди, координати осей, властивості координатної сітки.

Основні поняття: графік, лінійна апроксимація, візуалізація даних, легенда графіка, координатна сітка.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Роль графічних методів у обробці результатів фізико-хімічного експерименту.
2. Можливості програми Origin для аналізу результатів досліджень.
3. Чому перед побудовою графіка в Origin потрібно вірно оформити таблицю з результатами експеримента?
4. Як в Origin змінюють параметри осей координат та підписи графіків?
5. Основні режими побудови графіків в Origin.

6. Лінійна апроксимація. Її роль під час аналізу даних експериментів.
7. Які помилки можуть впливати на вигляд графіка та точність його інтерпретації?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Можливості Origin у обробці та візуалізації результатів експерименту в хімії.

Основні типи графіків у Origin та особливості їх використання.

Порівняння функціоналу Origin та Excel для побудови графіків.

Використання лінійної апроксимації під час аналізу та вивчення закономірностей хімічних процесів.

Особливості побудови мультиграфіків в Origin.

Математична обробка експериментальних даних в Origin.

Практичне завдання

У Origin побудуйте один із графіків на вибір за експериментальними або модельними даними залежності: швидкості реакції від температури; розчинності речовини від температури або оптичної густини від концентрації.

Під час виконання роботи:

- додайте дані до таблиці програми;
- назвіть стовпці та введіть одиниці вимірювання;
- побудуйте графік у режимі Line + Symbol;
- здійсніть налаштування осей, координатної сітки і легенди;
- проведіть лінійну апроксимацію даних;
- встановіть рівняння отриманої залежності.

Після завершення роботи проаналізуйте графіки та зробіть короткий висновок щодо характеру встановленої залежності.

Рекомендована література

Основна:

1. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
2. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
3. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №15

Тема: Аналіз та візуалізація хімічних даних за допомогою програмного забезпечення Origin.

Мета: Навчитися працювати з табличними даними у Origin; виконувати обчислення на основі експериментальних даних; візуалізувати результати у вигляді графіків та діаграм; аналізувати залежності та тенденції хімічних процесів.

Основні поняття: табличні дані, графік розчинності, лінійна апроксимація, лінія тренду, константа швидкості реакції, графік кінетичної залежності, енергія активації, інтегрування даних.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Які переваги та можливості програми Origin є найкориснішими під час обробки результатів дослідження.
2. Як інтерпретувати нахил прямої після проведення лінійної апроксимації?
3. Які графічні залежності характерні для реакцій другого порядку?
4. Які параметри використовують для оцінювання якості проведеної апроксимації в Origin?

5. Для чого під час аналізу даних додають до графіку лінію тренду?
6. Які помилки можуть впливати на точність графічного аналізу результатів експерименту?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Лінійна апроксимація та її роль в обробці результатів експерименту.

Аналіз кінетичних залежностей у хімії за допомогою графіків.

Визначення енергії активації фізико-хімічних процесів за результатами графічного аналізу.

Особливості побудови мультиграфіків для здійснення порівняльного аналізу.

Вплив точності даних експерименту на результати графічної обробки.

Використання програмного забезпечення Origin у освітній та науковій діяльності хіміків.

Практичне завдання

У Origin проведіть аналіз однієї з залежностей: зміни концентрації речовини з часом; залежності швидкості реакції від температури або розчинності речовини від температури.

Під час виконання роботи:

- заповніть таблицю даними експерименту та побудуйте відповідний графік;
- підпишіть осі, легенду та координатну сітку;
- здійсніть лінійну апроксимацію даних та виведіть рівняння залежності;
- проаналізуйте отриману залежності.

Після завершення роботи зробіть короткий висновок щодо закономірностей досліджуваного фізико-хімічного процесу.

Рекомендована література

Основна:

1. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
2. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
3. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №16

Тема: Побудова 3D-графіків розчинності речовин у різних розчинниках.

Мета: Навчитися представляти багатовимірні експериментальні дані за допомогою 3D-графіків у програмному середовищі Origin. Навчитись будувати 3D Surface Plot для порівняльного аналізу впливу температури та розчинника на розчинність речовини.

Основні поняття: Тривимірні графіки (3D Surface Plot), матриця даних у Origin, колірна шкала (Color Mapping), глибина кольору (Z-вісь), рельєфна візуалізація (Shading), поверхня залежності, інтерполяція та сітка, легенда, підписи.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Роль тривимірних графіків в аналізі експериментальних даних в хімії.
2. Які можливості Origin є найкориснішими під час побудови 3D-візуалізацій?
3. Типи 3D-графіків в Origin: особливості та відмінності.
4. Що показує колірна шкала на 3D-графіку?

5. Чи зазнає змін вигляд поверхні залежності під час зміни кольорів і рельєфу?
6. Чи можливо в Origin змінювати кут огляду та масштаб 3D-візуалізації?
7. Які переваги має 3D-візуалізація під час аналізу багатофакторних хімічних процесів?

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

3D-візуалізація у Origin та сфери її застосування в хімії.

Особливості побудови 3D-графіків для аналізу результатів експерименту в хімії.

Порівняння функціоналу Origin та Excel для побудови 3D-графіків.

Використання кольорових шкал для аналізу інтенсивності процесів.

Аналіз поверхонь залежності під час дослідження фізико-хімічних процесів.

Практичне завдання

У Origin побудуйте 3D-графік залежності розчинності речовини від температури та природи розчинника.

Під час виконання роботи:

- додайте експериментальні дані в таблиці, потім сформуєте матрицю для побудови 3D-графіка;
- побудуйте 3D-графік;
- здійсніть налаштування кольорової шкали та параметрів поверхні графіка;
- знайдіть оптимальний кут огляду графіка для кращої візуалізації;
- підпишіть осі, додайте легенду та вкажіть одиниці вимірювання.

Після завершення роботи проаналізуйте отриману 3D-залежність та зробіть висновок щодо впливу температури й типу розчинника на розчинність досліджуваної речовини.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №17

Тема: Інтеграція хімічних структур і моделей з спеціалізованих редакторів у документи пакету MS Office.

Мета: Опанувати навички імпорту хімічних структур, формул, 3D-моделей у документи Word, таблиці Excel, бази Access і презентації PowerPoint. Навчитися використовувати формати вставки: рисунок, об'єкт, вбудований документ, векторне зображення, **.cdx.

Основні поняття: об'єкт OLE (Object Linking and Embedding), векторне зображення, растрове зображення, методи вставки, хімічні структури в презентаціях.

План заняття:

1. Організаційний момент.
2. Тестовий контроль знань здобувачів вищої освіти.
3. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи.
4. Виконання лабораторної роботи.
5. Презентація підготовлених повідомлень здобувачами вищої освіти.

Інструкція до виконання:

1. Тестовий контроль знань

Опрацюйте запропоновані літературні джерела та підготуйтеся до індивідуального тестування за основними поняттями теми.

2. Теоретичне опитування за планом самостійної роботи

Самостійно опрацюйте запропоновані контрольні запитання/завдання та підготуйтеся до усного виступу та співбесіди за ними.

Контрольні запитання/завдання

1. Які відмінності між вставкою рисунка та вставкою об'єкта?
2. Які переваги використання файлів у форматі *.cdx в документах Word?
3. Чому для підготовки презентацій краще використовувати векторні зображення?
4. Як зробити об'єкт ChemDraw доступним для подальшого редагування?

5. Чому якість растрових зображень погіршується після масштабування?
6. Які способи вставки хімічних формул та структур найзручніші для підготовки наукових звітів і презентацій?
7. Переваги використання спеціалізованих хімічних редакторів під час оформлення навчальних та наукових матеріалів.

Завдання для індивідуальної роботи.

Оберіть запропоновану тему повідомлення. Підготуйте усний виступ та електронну презентацію з теми. Будьте готові виступити перед аудиторією.

Теми повідомлень:

Формати графічних файлів у хімічній візуалізації та їх особливості.

Способи вставки хімічних структур у документи: переваги та недоліки.

Особливості використання векторних і растрових зображень.

Підготовка хімічних презентацій у PowerPoint: особливості оформлення та вимоги до якості графічних об'єктів.

Інтеграція 3D-моделей молекул у документи та презентації.

Використання спеціалізованого програмного забезпечення для оформлення результатів хімічних досліджень

Практичне завдання

Підготуйте фрагмент наукового або навчального документа з використанням хімічних структур і графічних матеріалів.

Під час виконання роботи:

- створіть формулу речовини у програмі ChemDraw або іншому хімічному редакторі;
- вставте формулу до документа Word у вигляді рисунка та OLE-об'єкта;
- порівняйте можливості редагування для обох способів вставки;
- експортуйте структурну формулу у векторному форматі та додайте її до презентації PowerPoint;

- перевірте якість зміни масштабу зображення;
- додайте до створеного документа таблицю або схему з коротким описом властивостей речовини.

Після завершення роботи зробіть висновок щодо найзручнішого способу вставки хімічних структур під час підготовки навчальних матеріалів або презентацій.

Рекомендована література

Основна:

1. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
2. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с.

Додаткова:

1. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.
2. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.

Лабораторне заняття №18

Тема: Модульна контрольна №3 «Графічне відображення даних з використанням пакета програм Origin»

Обсяг вимог визначається програмою

Рекомендована література

Основна:

1. Коновалова С.О. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій. – Краматорськ: ДДМА, 2020. – 80 с.
2. Кулігін М.Л. Комп'ютерна хімія: конспект лекцій. – Херсон: ХНТУ, 2013. – 80 с.
3. Бондар О.С. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник. Чернігів: ЧНПУ, 2017. – 68 с.
4. Туровський М.А., Туровська О. М. Практичний курс комп'ютерної структурної хімії. Навчальний посібник. Донецьк: ДонНУ, 2004. 131 с
5. Ракша О. В. Інформаційні технології у фізичній хімії: навчально-методичний посібник / О. В. Ракша. – Донецьк: ДонНУ, 2013. – 98 с.
6. Олексеюк С.Т., Проц Д.І., Супрунович С.В. Прикладні комп'ютерні програми для аналітичної та органічної хімії. – Луцьк: РВВ „Вежа” ВДУ ім. Лесі Українки, 2004, – Ч.І. – 82 с
7. Туровська О. М. Практикум з квантової хімії. Навчально-методичний посібник / О. М. Туровська, М.А. Туровський. Донецьк: ДонНУ, 2007. – 81 с.

Додаткова

1. ACD/ChemSketch. Version 2012 for Microsoft Windows. Drawing Chemical Structures and Graphical Images Tutorial. / Advanced Chemistry Development, Inc. 2013. – 156 p.
2. Bienz S. Short Manual to the Chemical Drawing Program ChemDraw / S. Bienz. University of Zurich. 2013. – 22 p.
3. Гужва В.М. Інформаційні системи і технології на підприємствах : навч. посібник.- К: КНЕУ, 2001. - 400 с
4. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – London, 1999. – 429.
5. Leach A. Molecular Modelling. Principles and Applications. – Dorset, 2001. – 744.
6. Неділько С.А. Математичні методи в хімії: Підручник. – К.: Либідь, 2005, 256 с.

Інтернет ресурси:

1. Бібліотека Житомирського державного університету імені Івана Франка [Електронний ресурс] – режим доступу до ресурсу: <http://irbis.zu.edu.ua>
2. Національна бібліотека України імені В.І.Вернадського Франка [Електронний ресурс] – режим доступу: <http://nbuv.gov.ua>
3. Пакет програмного забезпечення ChemOffice, зокрема, графічний редактор хімічних формул ChemDraw – <http://www.cambridgesoft.com>
4. ACD/ChemSketch Freeware for personal or academic use, пакет програмного забезпечення для малювання хімічних структур – <http://www.acdlabs.com>
5. MarvinSketch редактор хімічних формул – <http://www.chemaxon.com>
6. PubChem, відкрита база даних хімії Національного інституту охорони здоров'я (NIH) <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>
7. ChemSpider, безкоштовна база даних хімічних структур – <http://www.chemspider.com>
8. Organic Syntheses, база методик синтезу – <http://www.orgsyn.org>
9. e-Molecules, онлайн ресурс пошуку інформації у власній базі даних ресурсу та провідних хімічних каталогах і базах даних властивостей хімічних сполук – <https://www.emolecules.com>